

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE MATEMÁTICA  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Um Problema Inverso de  
Condições de Contorno em  
Teoria de Transporte**

por

**Rejane Pergher**

Dissertação submetida como requisito parcial  
para a obtenção do grau de  
Mestre em Matemática Aplicada

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello  
Orientadora

Porto Alegre, abril de 1997.

UFRGS  
SISTEMA DE BIBLIOTECAS  
BIBLIOTECA SETORIAL DE MATEMÁTICA

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Pergher, Rejane

Um Problema Inverso de Condições de Contorno em Teoria de Transporte / Rejane Pergher.—Porto Alegre: CPGMA da UFRGS, 1997.

47 p.: il.

Dissertação (mestrado)—Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Matemática, Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 1997. Orientador: Liliâne Basso Barichello

Dissertação:

16562

DISSERTACAO/MAT  
P439U  
1997

MAT  
1997/211023-5  
1997/09/22  
8026

*Para meus pais  
e para Valdecir.*

## AGRADECIMENTOS

Agradeço, de forma especial, à Profa. Dra. Liliane Basso Barichello pelo valioso apoio na realização deste trabalho, bem como o carinho e amizade compartilhados.

Ao colega e companheiro Valdecir Bottega pela colaboração, dedicação, compreensão e pelo amor e carinho sempre presente em todas as horas.

Aos colegas Magda e Darlan pela colaboração nas discussões deste trabalho, pelo bom humor e amizade.

A todos os colegas da graduação e pós-graduação da matemática pela amizade e carinho.

Aos professores do Instituto de Matemática e do curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da UFRGS que me incentivaram a chegar até aqui.

A Ana, secretária do CPGMAp, pela amizade e atenção.

A todos os familiares e amigos que sempre torceram pelo sucesso na realização deste trabalho.

Aos meus pais, o meu muito obrigada...

## RESUMO

Neste trabalho, aplicamos o método  $LTS_N$  na solução de um problema inverso de condições de contorno em teoria de transporte. Para o problema inverso considerado aqui, supomos que a densidade de radiação é conhecida em certos pontos no interior do domínio e então procuramos determinar que funções geram tal densidade. A motivação para este trabalho vem do campo da radioterapia, uma vez que é difícil a determinação das características da radiação incidente na superfície externa do corpo que deve originar a dose desejada no interior. Propomos duas abordagens: uma que pode ser aplicada independentemente do método usado para resolver a equação de transporte e a outra associada especificamente à formulação  $LTS_N$ . Apresentamos resultados numéricos para diferentes tipos de condições de contorno até a aproximação  $LTS_{12}$ .

# ABSTRACT

In this work we applied the  $LTS_N$  method to the solution of an inverse boundary-condition problem in transport theory. For the inverse problem considered here, we suppose that the radiation density is known at certain positions within the medium, and we then seek to determine what functions that can induce such a radiation density. The motivation for this problem comes from the field of radiation therapy, where it is often a difficult task to predict the angular shape and strength of an exposing radiation beam incident on the surface of the body that will give rise to a desired internal dose. We propose two approaches: the first one can be applied independent of the method used to solve the transport equation and the second one is specifically associated to the  $LTS_N$  formulation. We present numerical results for different types of boundary-conditions until  $LTS_{12}$  approximation.

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\mathbf{A}_N(s)$	Matriz simbólica associada à formulação $LTS_N$ - um grupo de energia
$\mathbf{A}_N^{-1}(s)$	Matriz inversa da matriz $\mathbf{A}_N(s)$
$a_{i,j}$	Elementos da matriz $\mathbf{A}$ , onde $\mathbf{A}_N(s) = s\mathbf{I} + \mathbf{A}$
$a_k$	Coefficientes da expansão da condição de contorno em termos de uma base
$b_k$	Coefficientes da expansão da condição de contorno em termos de uma base
$\mathbf{B}(\tau)$	Matriz da transformada inversa de Laplace de $\mathbf{A}_N^{-1}(s)$
$b_{i,j}(\tau)$	Elementos da matriz $\mathbf{B}(\tau)$
$\mathbf{B}^*(\tau)$	Matriz $\mathbf{B}(\tau)$ modificada pela mudança na base
$F_1(\mu)$	Intensidade de radiação incidente em $\tau = 0$
$F_2(\mu)$	Intensidade de radiação incidente em $\tau = \tau_0$
$\mathbf{H}(\tau)$	Matriz convolução da matriz $\mathbf{B}(\tau)$ com o vetor $\mathbf{S}(\tau)$
$\mathbf{H}^*(\tau)$	Matriz $\mathbf{H}(\tau)$ modificada pela mudança na base
$H_k(\mu)$	Conjunto de funções base
$I(\tau, \mu)$	Intensidade de radiação na direção $\mu$
$I_m(\tau)$	Intensidade de radiação na direção discreta $\mu_m$
$\mathbf{I}(\tau)$	Vetor de componentes $I_m(\tau)$
$\bar{I}_m(s)$	Transformada de Laplace da função $I_m(\tau)$
$\bar{\mathbf{I}}(s)$	Vetor de componentes $\bar{I}_m(s)$

$\mathbf{I}(0)$	Vetor cujas componentes são a intensidade de radiação em cada direção discreta, em $\tau = 0$
$\mathbf{I}^*(0)$	Vetor $\mathbf{I}(0)$ modificado pela mudança na base
$\mathbf{I}$	Matriz identidade
$L$	Grau arbitrário de anisotropia
$N$	Ordem da quadratura de Gauss
$P_l(\mu)$	Polinômios de Legendre
$\mathcal{P}_k$	Matrizes coeficientes resultantes da inversão da transformada de Laplace
$Q(\tau, \mu)$	Termo de fonte na direção $\mu$
$Q_m(\tau)$	Termo de fonte na direção discreta $\mu_m$
$\bar{Q}_m(s)$	Transformada de Laplace da função $Q_m(\tau)$
$s$	Parâmetro complexo
$s_k$	Raízes do polinômio determinante de $\mathbf{A}_N(s)$ ou autovalores de $-A$
$\bar{S}_m(s)$	Transformada de Laplace da função $S_m(\tau)$
$\bar{\mathbf{S}}(s)$	Vetor de componentes $\bar{S}_m(s)$
$\mathcal{L}^{-1}$	Transformada inversa de Laplace
$\beta_l$	Coeficientes da expansão em polinômios de Legendre da lei de espalhamento
$\gamma_k^\alpha(\tau, \mu)$	Intensidade de radiação solução do k-ésimo problema direto
$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker
$\mu$	Direção da partícula espalhada
$\mu'$	Direção da partícula incidente

$\mu_m$	Raízes do polinômio de Legendre de N-ésimo grau: direções discretas
$\Xi_k^\alpha(\tau)$	Densidade de radiação resultante da solução do k-ésimo problema direto
$\omega$	Albedo para espalhamento simples
$\omega_m$	Pesos da quadratura de Gauss
$\rho_\beta^s$	Coefficiente para reflexão especular
$\rho_\beta^d$	Coefficiente para reflexão difusa
$\tau$	Variável ótica adimensional
$\tau_0$	Espessura ótica da placa
$\Phi(\tau)$	Densidade de radiação
$\hat{\Phi}(\tau)$	Densidade de radiação aproximada
$\Phi(\tau_i)$	Vetor cujas componentes são a densidade de radiação no ponto $\tau_i$

## LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 5$ e $10$ para o primeiro caso . . . . .	21
Tabela 4.2	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 50$ e $100$ para o primeiro caso . . . . .	22
Tabela 4.3	Problema inverso - $LTS_{12}$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 5$ e $10$ para o primeiro caso . . . . .	23
Tabela 4.4	Problema inverso - $LTS_{12}$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 50$ e $100$ para o primeiro caso . . . . .	23
Tabela 4.5	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$ e $10$ para o primeiro caso . . . . .	24
Tabela 4.6	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 20, 40, 60, 80$ e $100$ para o primeiro caso . . . . .	24
Tabela 4.7	Problema inverso - $LTS_{12}$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$ e $10$ para o primeiro caso . . . . .	25
Tabela 4.8	Problema inverso - $LTS_{12}$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 20, 40, 60, 80$ e $100$ para o primeiro caso . . . . .	25

Tabela 4.9	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 5$ e $10$ para o segundo caso . . . . .	26
Tabela 4.10	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 50$ e $100$ para o segundo caso . . . . .	27
Tabela 4.11	Problema inverso - $LTS_{12}$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 5$ e $10$ para o segundo caso . . . . .	27
Tabela 4.12	Problema inverso - $LTS_{12}$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 50$ e $100$ para o segundo caso . . . . .	28
Tabela 4.13	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$ e $10$ para o segundo caso . . . . .	28
Tabela 4.14	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 20, 40, 60, 80$ e $100$ para o segundo caso . . . . .	29
Tabela 4.15	Problema inverso - $LTS_{12}$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$ e $10$ para o segundo caso . . . . .	29
Tabela 4.16	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 5$ e $10$ para o terceiro caso . . . . .	30
Tabela 4.17	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 50$ e $100$ para o terceiro caso . . . . .	31

Tabela 4.18	Problema inverso - $LTS_{12}$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 5$ e 10 para o terceiro caso . . . . .	31
Tabela 4.19	Problema inverso - $LTS_{12}$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 50$ e 100 para o terceiro caso . . . . .	32
Tabela 4.20	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 5$ e 10 para o quarto caso . . . . .	33
Tabela 4.21	Problema inverso - $LTS_8$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 50$ e 100 para o quarto caso . . . . .	33
Tabela 4.22	Problema inverso - $LTS_{12}$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 5$ e 10 para o quarto caso . . . . .	34
Tabela 4.23	Problema inverso - $LTS_{12}$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 0, 50$ e 100 para o quarto caso . . . . .	34
Tabela 4.24	Problema inverso - $LTS_4$ - intensidade de radiação tomada em $\tau = 12, 14, 16$ e 18 . . . . .	35
Tabela 4.25	Problema inverso - $LTS_8$ - comparação das duas formulações . . . . .	36
Tabela 4.26	Problema inverso - $LTS_{12}$ - comparação das duas formulações . . . . .	36

# SUMÁRIO

RESUMO . . . . .	ii
ABSTRACT . . . . .	iii
LISTA DE SÍMBOLOS . . . . .	iv
LISTA DE TABELAS . . . . .	vii
1 INTRODUÇÃO . . . . .	1
2 O PROBLEMA INVERSO . . . . .	4
2.1 Introdução . . . . .	4
2.2 Formulação . . . . .	5
3 MÉTODO $LTS_N$ . . . . .	9
3.1 Formulação . . . . .	9
3.2 O Método $LTS_N$ e o Problema Inverso . . . . .	15
4 RESULTADOS NUMÉRICOS . . . . .	19
4.1 Descrição Geral . . . . .	19

4.2	Aplicações . . . . .	21
5	CONCLUSÕES . . . . .	38
	BIBLIOGRAFIA . . . . .	40
ANEXO A-1 FORMULAÇÃO PARA INVERSÃO DA MATRIZ		
	$A_N(S)$ . . . . .	44
A-1.1	Redução da matriz pela Decomposição de Schur . . . . .	44
A-1.2	Inversão da matriz por particionamento . . . . .	45

# 1 INTRODUÇÃO

Na solução de problemas diretos, em teoria de transporte, o objetivo é normalmente a determinação da distribuição de partículas no interior e emergentes de um meio específico, a partir de condições iniciais e distribuição incidente conhecida. Os problemas inversos se caracterizam fundamentalmente pelo fato de que uma ou algumas dessas condições não são conhecidas, ou seja, o objetivo é exatamente o de determinar as propriedades e/ou o tamanho do meio, ou ainda, as características do contorno desconhecido.

Os problemas inversos constituem uma classe de problemas de interesse em teoria de transporte que vêm sendo estudados ao longo dos anos motivados por aplicações em diversas áreas de engenharia e física como, por exemplo, a medicina nuclear. Dois tipos clássicos de problemas são mais comumente abordados, caracterizados pelo fato de que uma vez conhecida a distribuição de partículas no meio, procuramos determinar as características desse meio através do qual as partículas se propagam [8, 14] ou fontes [12, 16, 17] que tenham gerado essas partículas. Também são tratados problemas de determinação da condição inicial [18]. Em trabalho recente, McCormick [13] apresenta uma completa revisão sobre essa classe de problemas na área de transferência radiativa.

Há poucos anos atrás, motivados pela abordagem de problemas de planejamento de doses em tratamentos de radioterapia, Barichello e Vilhena [1, 3]

propuseram um novo tipo de problema inverso, que pode ser dito de “condições de contorno”. Esse problema se caracteriza pela determinação das intensidades de radiação incidentes na fronteira do domínio, a partir do conhecimento dos valores da densidade de radiação em pontos interiores do mesmo. Na verdade, a proposição desse novo tipo de problema se baseou fortemente, além da motivação acima exposta, na possibilidade de solução do mesmo pelo método  $LTS_N$  [4, 22], cuja formulação relaciona diretamente a intensidade de radiação em qualquer ponto do domínio, com a intensidade de radiação na fronteira. Nesse contexto, foram apresentadas soluções, para esse tipo de problema inverso, em meios linearmente anisotrópicos e cuja distribuição dada foi obtida a partir da condição de contorno do tipo constante [1].

Recentemente, uma nova abordagem [2] permitiu que esse tipo de problema inverso pudesse ser resolvido independentemente do método que se use para solucionar a equação de transporte. Essa nova proposta se baseia na expansão da condição de contorno em termos de uma base e de uma apropriada decomposição do problema direto em função dessa expansão. Alguns resultados numéricos foram obtidos com o método dos harmônicos esféricos [2].

Neste trabalho, o método  $LTS_N$  será aplicado, juntamente com esta nova proposta [2], para a obtenção de resultados para o problema inverso com condições de contorno mais genéricas, incluindo reflexivas, bem como para problemas com mais alto grau de anisotropia. Além disso, uma mudança de base na solução  $LTS_N$ , recentemente implementada [5], será testada para comparação dos

resultados obtidos anteriormente [1, 3], por esse método especificamente. Assim sendo, no capítulo 2, definimos o problema e apresentamos a proposta de solução que poderá ser usada de forma mais geral. Os resultados numéricos serão obtidos pelo método  $LTS_N$ , que será descrito no capítulo 3, bem como as características específicas dessa formulação que permitem uma solução do problema inverso diferentemente da que foi apresentada no capítulo 2. Resultados numéricos obtidos a partir das duas formas de solução são mostrados no capítulo 4, até a aproximação  $LTS_{12}$ . Finalmente, algumas conclusões são apresentadas no capítulo 5.

## 2 O PROBLEMA INVERSO

### 2.1 Introdução

O problema inverso abordado nesse trabalho é caracterizado por ser um problema de determinação da intensidade de radiação incidente num domínio, a partir do conhecimento da densidade de radiação em pontos interiores desse domínio. Como já comentado, a solução desse tipo de problema tem importância e aplicação no planejamento de doses em radioterapia, uma vez que gostaríamos de determinar as características da radiação incidente na superfície externa do corpo que deveria originar a dose desejada no interior.

Notamos que a análise de aplicações práticas da radioterapia pode, em geral, ser baseada em um modelo matemático mais complexo que aquele considerado aqui, que nesse caso pode vir a requerer métodos estritamente numéricos. Por isso, o modelo simplificado considerado aqui deve ser entendido como uma sugestão inicial de modelagem que ainda pode ser tratada segundo a abordagem analítica.

## 2.2 Formulação

Consideremos a equação de transferência [9] para a intensidade de radiação  $I(\tau, \mu)$ ,

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} I(\tau, \mu) + I(\tau, \mu) = \frac{\omega}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(\tau, \mu') d\mu', \quad (2.2.1)$$

onde  $\tau \in (0, \tau_0)$  é a variável ótica,  $\mu \in [-1, 1]$  é o cosseno do ângulo polar, medido do eixo positivo  $\tau$ , usado para descrever a direção de propagação da radiação e  $\omega$  é o albedo para espalhamento simples. Além disso, os  $\beta_l$  são os coeficientes da expansão em polinômios de Legendre da lei de espalhamento.

Para problemas diretos em transferência radiativa, normalmente para a equação (2.2.1), temos as seguintes condições de contorno:

$$I(0, \mu) = F_1(\mu) + \rho_1^s I(0, -\mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 I(0, -\mu') \mu' d\mu' \quad (2.2.1a)$$

e

$$I(\tau_0, -\mu) = F_2(\mu) + \rho_2^s I(\tau_0, \mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 I(\tau_0, \mu') \mu' d\mu' \quad (2.2.1b)$$

para  $\mu \in (0, 1]$ .  $F_1(\mu)$  e  $F_2(\mu)$  são consideradas dadas e,  $\rho_\beta^s$  e  $\rho_\beta^d$ , para  $\beta = 1$  e  $2$ , são, respectivamente, os coeficientes para reflexão especular e difusa.

Para o problema inverso considerado aqui [3], supomos que a densidade

de radiação

$$\Phi(\tau) = \int_{-1}^1 I(\tau, \mu) d\mu \quad (2.2.2)$$

é conhecida em certas posições  $\{\tau_i\}$  dentro do meio e então procuramos determinar que funções  $F_1(\mu)$  e  $F_2(\mu)$ , para  $\mu \in (0, 1]$ , podem induzir tal densidade de radiação.

Como proposta para solução desse problema, formulamos e resolvemos dois conjuntos de problemas diretos: o primeiro conjunto, para  $k = 0, 1, \dots, k_1$ , expresso pela equação de transferência

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} \gamma_k^1(\tau, \mu) + \gamma_k^1(\tau, \mu) = \frac{\omega}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \gamma_k^1(\tau, \mu') d\mu', \quad (2.2.3)$$

para  $\tau \in (0, \tau_0)$  e  $\mu \in [-1, 1]$  e com condições de contorno

$$\gamma_k^1(0, \mu) = H_k(\mu) + \rho_1^s \gamma_k^1(0, -\mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 \gamma_k^1(0, -\mu') \mu' d\mu' \quad (2.2.3.a)$$

e

$$\gamma_k^1(\tau_0, -\mu) = \rho_2^s \gamma_k^1(\tau_0, \mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 \gamma_k^1(\tau_0, \mu') \mu' d\mu' \quad (2.2.3.b)$$

para  $\mu \in (0, 1]$ . O segundo conjunto, para  $k = 0, 1, \dots, k_2$ , expresso pela equação de transferência

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} \gamma_k^2(\tau, \mu) + \gamma_k^2(\tau, \mu) = \frac{\omega}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \gamma_k^2(\tau, \mu') d\mu', \quad (2.2.4)$$

para  $\tau \in (0, \tau_0)$ ,  $\mu \in [-1, 1]$  e condições de contorno

$$\gamma_k^2(0, \mu) = \rho_1^s \gamma_k^2(0, -\mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 \gamma_k^2(0, -\mu') \mu' d\mu' \quad (2.2.4.a)$$

e

$$\gamma_k^2(\tau_0, -\mu) = H_k(\mu) + \rho_2^s \gamma_k^2(\tau_0, \mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 \gamma_k^2(\tau_0, \mu') \mu' d\mu' \quad (2.2.4.b)$$

para  $\mu \in (0, 1]$ . Usamos  $\{H_k\}$  para denotar um conjunto de funções base que, a princípio, podem ser quaisquer.

Se resolvermos estes dois conjuntos de problemas básicos e determinarmos, para  $k = 0, 1, \dots, k_1$ , a densidade de radiação

$$\Xi_k^1(\tau) = \int_{-1}^1 \gamma_k^1(\tau, \mu) d\mu, \quad (2.2.5)$$

e para  $k = 0, 1, \dots, k_2$ , a densidade de radiação

$$\Xi_k^2(\tau) = \int_{-1}^1 \gamma_k^2(\tau, \mu) d\mu, \quad (2.2.6)$$

podemos aproximar a densidade de radiação definida na equação (2.2.2) por

$$\hat{\Phi}(\tau) = \sum_{k=0}^{k_1} a_k \Xi_k^1(\tau) + \sum_{k=0}^{k_2} b_k \Xi_k^2(\tau), \quad (2.2.7)$$

onde as constantes  $\{a_k\}$  e  $\{b_k\}$  são determinadas fazendo  $\hat{\Phi}(\tau)$  coincidir com a densidade de radiação desejada  $\Phi(\tau)$  em  $k_1 + k_2 + 2$  posições  $\{\tau_i\}$ . Dessa forma,

resulta que

$$\sum_{k=0}^{k_1} a_k \Xi_k^1(\tau_i) + \sum_{k=0}^{k_2} b_k \Xi_k^2(\tau_i) = \Phi(\tau_i), \quad (2.2.8)$$

para  $i = 1, 2, \dots, k_1 + k_2 + 2$ . Uma vez que este sistema de equações lineares é resolvido para  $\{a_k\}$  e  $\{b_k\}$ , segue que podemos encontrar as condições de contorno desejadas

$$F_1(\mu) = \sum_{k=0}^{k_1} a_k H_k(\mu) \quad (2.2.9)$$

e

$$F_2(\mu) = \sum_{k=0}^{k_2} b_k H_k(\mu) \quad (2.2.10)$$

para  $\mu \in (0, 1]$ . Notamos que nossa solução, dada pelas equações (2.2.9) e (2.2.10), é independente do método usado para resolver os problemas básicos definidos pelas equações (2.2.3) e (2.2.4).

Uma das propostas deste trabalho é utilizar o método  $LTS_N$  para obtenção de resultados numéricos através dessa formulação. Para tanto, no capítulo a seguir descreveremos sucintamente a formulação  $LTS_N$ .

### 3 MÉTODO $LTS_N$

#### 3.1 Formulação

Consideremos a equação de transferência [9] para a intensidade de radiação  $I(\tau, \mu)$ ,

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} I(\tau, \mu) + I(\tau, \mu) = \frac{\omega}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(\tau, \mu') d\mu' + Q(\tau, \mu), \quad (3.1.1)$$

com condições de contorno

$$I(0, \mu) = F_1(\mu), \quad \mu > 0 \quad (3.1.1a)$$

e

$$I(\tau_0, \mu) = F_2(\mu), \quad \mu < 0 \quad (3.1.1b)$$

Aqui, como no capítulo anterior,  $\tau \in (0, \tau_0)$  é a variável ótica,  $\mu \in [-1, 1]$  é o cosseno do ângulo polar, medido do eixo positivo  $\tau$ , usado para descrever a direção de propagação da radiação,  $\omega$  é o albedo para espalhamento simples e os  $\beta_l$  são os coeficientes da expansão dos polinômios de Legendre da lei de espalhamento. Além disso,  $Q(\tau, \mu)$  é o termo de fonte.

A aproximação  $S_N$  do problema de transferência radiativa (3.1.1) é obtida basicamente pela discretização da variável angular  $\mu$ . Assim sendo, o termo integral da equação (3.1.1) é aproximado por quadratura de Gauss de ordem  $N$ , resultando em um conjunto de equações diferenciais ordinárias

$$\mu_m \frac{dI_m(\tau)}{d\tau} + I_m(\tau) = \frac{\omega}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l P_l(\mu_m) \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) I_k(\tau) \omega_k + Q_m(\tau), \quad (3.1.2)$$

para  $m = 1, 2, \dots, N$ ,  $N$  par e condições de contorno

$$I_m(0) = F_1(\mu_m), \quad \mu > 0 \quad (3.1.2a)$$

e

$$I_m(\tau_0) = F_2(\mu_m), \quad \mu < 0. \quad (3.1.2b)$$

Os  $\mu_m$ , raízes do polinômio de Legendre de  $N$ -ésimo grau, são simétricos e ordenados tal que

$$-1 < \mu_N < \dots < \mu_{\frac{N}{2}+1} < 0 < \mu_{\frac{N}{2}} < \dots < \mu_1 < 1 \quad (3.1.3)$$

e  $\omega_k$  são os respectivos pesos da quadratura de Gauss. Ainda, na notação acima,  $I_m(\tau) = I(\tau, \mu_m)$  e  $Q_m(\tau) = Q(\tau, \mu_m)$ .

Para a resolução do problema de ordenadas discretas (3.1.2), através do método  $LTS_N$ , inicialmente aplicamos a transformada de Laplace na variável

especial, na equação (3.1.2), reescrita como

$$\frac{dI_m(\tau)}{d\tau} + \frac{1}{\mu_m} I_m(\tau) = \frac{\omega}{2\mu_m} \sum_{l=0}^L \beta_l P_l(\mu_m) \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) I_k(\tau) \omega_k + \frac{1}{\mu_m} Q_m(\tau), \quad (3.1.4)$$

com  $m = 1, 2, \dots, N$ , obtendo a equação para a intensidade de radiação transformada

$$\begin{aligned} s\bar{I}_m(s) + \frac{1}{\mu_m} \bar{I}_m(s) - \frac{\omega}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l \frac{P_l(\mu_m)}{\mu_m} \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) \bar{I}_k(s) \omega_k \\ = I_m(0) + \bar{S}_m(s), \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

sendo que a barra denota a transformada de Laplace,

$$\bar{S}_m(s) = \frac{\bar{Q}_m(s)}{\mu_m}, \quad (3.1.6)$$

e  $m = 1, 2, \dots, N$ . A equação (3.1.5) representa um sistema linear algébrico de  $N$  equações e  $N$  incógnitas, dado na forma matricial por

$$\mathbf{A}_N(s) \bar{\mathbf{I}}(s) = \mathbf{I}(0) + \bar{\mathbf{S}}(s). \quad (3.1.7)$$

A matriz  $\mathbf{A}_N(s)$  é de ordem  $N$  e pode ser escrita como

$$\mathbf{A}_N(s) = s\bar{\mathbf{I}} + \mathbf{A}, \quad (3.1.8)$$

sendo que  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade de ordem  $N$  e a matriz  $\mathbf{A}$  tem elementos

$$a_{i,j} = \begin{cases} \frac{1}{\mu_i} - \frac{\omega}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l \frac{P_l(\mu_i)}{\mu_i} P_l(\mu_j) \omega_j, & \text{se } i = j \\ -\frac{\omega}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l \frac{P_l(\mu_i)}{\mu_i} P_l(\mu_j) \omega_j, & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (3.1.9)$$

Ainda

$$\bar{\mathbf{I}}(s) = \begin{bmatrix} \bar{I}_1(s) \\ \bar{I}_2(s) \\ \vdots \\ \bar{I}_N(s) \end{bmatrix} \quad (3.1.10)$$

e

$$\mathbf{I}(0) = \begin{bmatrix} I_1(0) \\ I_2(0) \\ \vdots \\ I_N(0) \end{bmatrix}, \quad (3.1.11)$$

esse último é o vetor cujas componentes representam a intensidade de radiação em cada direção calculada em  $\tau = 0$  e, finalmente,

$$\bar{\mathbf{S}}(s) = \begin{bmatrix} \frac{\bar{Q}_1(s)}{\mu_1} \\ \frac{\bar{Q}_2(s)}{\mu_2} \\ \vdots \\ \frac{\bar{Q}_N(s)}{\mu_N} \end{bmatrix}. \quad (3.1.12)$$

Para a resolução da equação (3.1.7), é necessário que se determine a inversa da matriz  $\mathbf{A}_N(s)$ . Uma fórmula analítica para a inversão desta matriz foi

obtida por Oliveira [15], resultando que  $\mathbf{A}_N^{-1}(s)$  é da forma

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = \frac{s^{N-1}\mathbf{P}_{N-1} + s^{N-2}\mathbf{P}_{N-2} + \cdots + s\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_0}{\det \mathbf{A}_N(s)}, \quad (3.1.13)$$

com as matrizes  $\mathbf{P}$ 's definidas em [15]. Assim, por (3.1.7),

$$\bar{\mathbf{I}}(s) = \mathbf{A}_N^{-1}(s)\mathbf{I}(0) + \mathbf{A}_N^{-1}(s)\bar{\mathbf{S}}(s), \quad (3.1.14)$$

e, conseqüentemente,

$$\mathbf{I}(\tau) = \mathcal{L}^{-1}\{\mathbf{A}_N^{-1}(s)\mathbf{I}(0)\} + \mathcal{L}^{-1}\{\mathbf{A}_N^{-1}(s)\bar{\mathbf{S}}(s)\}. \quad (3.1.15)$$

Sendo

$$\mathbf{B}(\tau) = \mathcal{L}^{-1}\{\mathbf{A}_N^{-1}(s)\} \quad (3.1.16)$$

e

$$\mathbf{S}(\tau) = \mathcal{L}^{-1}\{\bar{\mathbf{S}}(s)\}, \quad (3.1.17)$$

temos

$$\mathbf{I}(\tau) = \mathbf{B}(\tau)\mathbf{I}(0) + \mathbf{B}(\tau) * \mathbf{S}(\tau), \quad (3.1.18)$$

onde

$$\mathbf{B}(\tau) * \mathbf{S}(\tau) = \int_{x=0}^{\tau} \mathbf{B}(\tau - x)\mathbf{S}(x)dx. \quad (3.1.19)$$

De acordo com (3.1.13), cada elemento de  $\mathbf{A}_N^{-1}(s)$  é um quociente de polinômios em  $s$  e, portanto, a transformada inversa de Laplace pode ser calculada analiticamente pela técnica de expansão de Heaviside, resultando que

$$\mathbf{B}(\tau) = \sum_{k=1}^N \mathcal{P}_k e^{s_k \tau}, \quad (3.1.20)$$

onde  $s_k$  são as  $N$  raízes do determinante da matriz  $\mathbf{A}_N(s)$ , que também podem ser obtidos como autovalores da matriz  $-\mathbf{A}$  e  $\mathcal{P}_k$  são as  $N$  matrizes coeficientes, provenientes da inversão da transformada de Laplace.

É importante observar que nenhuma aproximação foi feita ao longo da derivação da solução da aproximação  $S_N$ . E, assim, dizemos que o método  $LTS_N$  estabelece uma solução analítica para o problema de ordenadas discretas unidimensional. No entanto, é importante salientar que na expressão (3.1.18), conhecemos apenas as  $\frac{N}{2}$  primeiras componentes do vetor  $\mathbf{I}(0)$ , dados pelas condições de contorno (3.1.1a). Para a determinação das restantes  $\frac{N}{2}$  componentes desconhecidas, aplicamos em (3.1.18) as condições de contorno em  $\tau = \tau_0$  dadas por (3.1.1b), ficando assim completamente estabelecida a solução.

Outro aspecto a ressaltar é que como a matriz  $\mathbf{B}(\tau)$  envolve exponenciais, ao aumentarmos o  $N$ , aumentam as raízes  $s_k$  e temos problemas computacio-

nais de overflow, bem como se aumentarmos a espessura da placa. Para solucionar este problema, foi desenvolvido por Barichello et al. [5] uma mudança de base e a equação (3.1.20) foi reescrita como

$$\mathbf{B}^*(\tau) = \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}} [\mathcal{P}_k e^{-s_k(\tau_0 - \tau)} + \mathcal{P}_{k+\frac{N}{2}} e^{-s_k \tau}], \quad s_k > 0. \quad (3.1.21)$$

Assim, teremos:

$$\mathbf{I}(\tau) = \mathbf{B}^*(\tau)\mathbf{I}^*(0) + \mathbf{H}^*(\tau), \quad (3.1.22)$$

onde  $\mathbf{I}^*(0)$  é um novo vetor de incógnitas, relativamente à equação (3.1.18). Para conhecermos  $\mathbf{I}^*(0)$  aplicamos as  $N$  condições de contorno agora em (3.1.22). Este procedimento tem se mostrado bem mais vantajoso computacionalmente.

## 3.2 O Método $LTS_N$ e o Problema Inverso

Como já foi dito anteriormente, a proposta de solução, apresentada no capítulo 2, para o problema inverso tratado nesse trabalho, é aplicável a diferentes métodos que possam solucionar o problema direto. No entanto, características específicas da formulação  $LTS_N$  permitem ainda um outro tratamento para esse tipo de problema inverso. Na verdade, da equação (3.1.18), considerando, por simplicidade,

o problema homogêneo,

$$\mathbf{I}(\tau) = \mathbf{B}(\tau)\mathbf{I}(0), \quad (3.2.1)$$

onde

$$\mathbf{B}(\tau) = \sum_{k=1}^N \mathcal{P}_k e^{s_k \tau}, \quad (3.2.2)$$

vemos, em (3.2.1), que existe uma relação entre a intensidade de radiação no contorno  $\tau = 0$  e em qualquer outro ponto do domínio. Sendo  $b_{i,j}$  os elementos da matriz  $\mathbf{B}(\tau)$ , de (3.2.1) e de (3.2.2),

$$I_m(\tau) = \sum_{j=1}^N b_{m,j}(\tau) I_j(0). \quad (3.2.3)$$

Portanto, partindo da definição da densidade de radiação aproximada,

$$\hat{\Phi}(\tau_i) = \sum_{j=1}^N I_j(\tau_i) \omega_j, \quad (3.2.4)$$

ou seja,

$$\hat{\Phi}(\tau_i) = I_1(\tau_i) \omega_1 + \cdots + I_N(\tau_i) \omega_N, \quad (3.2.5)$$

substituindo (3.2.3) em (3.2.5) e rearranjando os termos,

$$\hat{\Phi}(\tau_i) = \left[ \sum_{m=1}^N b_{m,1}(\tau_i) \omega_m \right] I_1(0) + \cdots + \left[ \sum_{m=1}^N b_{m,N}(\tau_i) \omega_m \right] I_N(0). \quad (3.2.6)$$

Obtemos um sistema linear de ordem  $N$ , cujas incógnitas são exatamente os valores da intensidade de radiação em  $\tau = 0$  em cada uma das direções. Para obtermos solução única para esse problema, precisamos que o número de pontos  $\tau_i$ , onde a densidade de radiação é conhecida, seja igual a  $N$ . O sistema (3.2.6) pode ser reescrito

$$\mathbf{C}\mathbf{I}(0) = \hat{\Phi}(\tau_i), \quad (3.2.7)$$

onde

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} b_{1,1}(\tau_1)\omega_1 + \cdots + b_{N,1}(\tau_1)\omega_N & \cdots & b_{1,N}(\tau_1)\omega_1 + \cdots + b_{N,N}(\tau_1)\omega_N \\ \vdots & & \vdots \\ b_{1,1}(\tau_N)\omega_1 + \cdots + b_{N,1}(\tau_N)\omega_N & \cdots & b_{1,N}(\tau_N)\omega_1 + \cdots + b_{N,N}(\tau_N)\omega_N \end{bmatrix}, \quad (3.2.8)$$

$$\mathbf{I}(0) = \begin{bmatrix} I_1(0) \\ \vdots \\ I_N(0) \end{bmatrix} \quad (3.2.9)$$

e

$$\hat{\Phi}(\tau_i) = \begin{bmatrix} \hat{\Phi}(\tau_1) \\ \vdots \\ \hat{\Phi}(\tau_N) \end{bmatrix}. \quad (3.2.10)$$

Depois de encontrados os valores da intensidade no contorno  $\tau = 0$ , temos que

$$I_m(\tau_0) = \sum_{j=1}^N b_{m,j}(\tau_0) I_j(0), \quad m = \frac{N}{2} + 1, \dots, N, \quad (3.2.11)$$

que representa a intensidade emergente na fronteira  $\tau = \tau_0$  em cada uma das direções.

Esse tipo de formulação foi testado anteriormente em problemas com anisotropia linear [1, 3] se mostrando inviável para o tratamento de pontos que não estivessem próximos à fronteira e, mesmo nesse caso, aumentando rapidamente o mal condicionamento do sistema (3.2.7) com o aumento de  $N$ .

Nesse trabalho, implementamos essa formulação juntamente com a mudança no tratamento das exponenciais descrita em (3.1.21). Nesse caso,

$$\mathbf{I}(\tau) = \mathbf{B}^*(\tau) \mathbf{I}^*(0), \quad (3.2.12)$$

e, então, depois de calcularmos  $\mathbf{I}^*(0)$ , como em (3.2.6), determinamos

$$I_m(0) = \sum_{j=1}^N b_{m,j}^*(0) I_j^*(0), \quad m = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}. \quad (3.2.13)$$

Testamos esse procedimento para os problemas tratados em [1] e outros com maior grau de anisotropia e condições de contorno mais genéricas, cujos resultados serão apresentados no capítulo seguinte.

## 4 RESULTADOS NUMÉRICOS

### 4.1 Descrição Geral

Para a obtenção dos resultados numéricos, formulamos um programa em linguagem FORTRAN. Para o cálculo dos autovalores da matriz  $-\mathbf{A}$  (raízes do determinante da matriz  $\mathbf{A}_{\mathbf{N}}(s)$ ), usamos a subrotina RG (que implementa o algoritmo QR) e para a resolução dos sistemas lineares envolvidos, usamos as subrotinas DGECO e DGESL (eliminação de Gauss), todas elas do pacote matemático Linpack [10]. Já para a inversão da matriz  $\mathbf{A}_{\mathbf{N}}(s)$ , utilizamos o algoritmo de Trzaska [20, 21], que mostra limitações computacionais para valores grandes de  $N$  e, por esse motivo, nossos resultados são apresentados até  $N=12$ . Essa, no entanto, não deverá ser uma restrição para trabalhos futuros, uma vez que foi desenvolvido [6, 7] um método recursivo para inversão dessa matriz simbólica que já garante resultados até  $N$  aproximadamente igual a 390. O referido método é apresentado no anexo A-1.

Usamos uma lei de espalhamento específica para gerar uma tabela dos coeficientes  $\{\beta_l\}$  afim de testar nossa técnica de solução, a lei de espalhamento binomial [11],

$$\beta_l = \left(\frac{2l+1}{2l-1}\right) \left(\frac{L+1-l}{L+1+l}\right) \beta_{l-1}, \quad l = 1, \dots, L \quad (4.1.1)$$

e  $\beta_0 = 1$ .

Por uma questão de clareza, utilizamos, neste capítulo, o termo “formulação 1” para referenciar a solução para o problema inverso apresentada no capítulo 2 e “formulação 2” para aquela apresentada no capítulo 3, especificamente para o método  $LTS_N$ .

Para a formulação 1, apresentamos resultados usando  $H_k = P_{2k}(\mu)$ , para  $k = 0, 1, \dots, k_1$ , como o conjunto de funções base, onde  $P_n(\mu)$  denota o polinômio de Legendre de ordem  $n$ . Além disso, por questões de simplicidade, consideramos o caso onde não há radiação incidindo na condição de contorno direita. Para tratar esse caso, usamos  $k_2 = -1$  no nosso formalismo e, então, o segundo conjunto de problemas diretos, definido por (2.2.4), não é calculado e as somas  $\{b_k\}$  nas equações (2.2.7) e (2.2.8) podem ser ignoradas na resolução do problema.

Finalmente, para todos os exemplos, avaliamos a condição de contorno  $F_1(\mu)$  para  $\mu_m > 0$ ,  $m = 1, \dots, \frac{N}{2}$  (positivos), obtida aproximadamente e comparamos com a condição de contorno exata. Ainda, consideramos a densidade de radiação conhecida em diferentes números de pontos, em diferentes posições no interior do domínio.

## 4.2 Aplicações

Inicialmente, tratamos algumas aplicações com a “formulação 1”.

No primeiro caso, tomamos ,  $\omega = 0.99$ ,  $\tau_0 = 100.0$ , diferentes graus de anisotropia  $L < N$  e não consideramos reflexão especular ou difusa ( $\rho_\beta^s = 0$ ,  $\rho_\beta^d = 0$ ). Resolvemos, usando o método  $LTS_N$ , o problema direto definido por (2.2.3), sujeito às equações (2.2.3a) e (2.2.3b) com

$$F_1(\mu) = \sum_{k=0}^{k_1} P_{2k}(\mu), \quad (4.2.2)$$

nos pontos  $\tau_i$ , conforme descrito abaixo.

Utilizamos, inicialmente, a aproximação  $LTS_8$  a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação em pontos próximos à fronteira esquerda,  $\tau = 0$ , 5 e 10 e em pontos distribuídos no domínio,  $\tau = 0$ , 50 e 100, respectivamente, com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 7$ . Os resultados são apresentados nas tabelas 4.1 e 4.2.

Tabela 4.1: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0$ , 5 e 10 para o primeiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.520529	2.520529
$F_1(\mu_2)$	1.209293	1.209293
$F_1(\mu_3)$	0.587301	0.587301
$F_1(\mu_4)$	0.804245	0.804245

Tabela 4.2: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0$ , 50 e 100 para o primeiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.520529	2.520529
$F_1(\mu_2)$	1.209293	1.209293
$F_1(\mu_3)$	0.587301	0.587301
$F_1(\mu_4)$	0.804245	0.804245

Observamos que tomando pontos, como por exemplo,  $\tau = 2, 5$  e  $10$ , ou seja, sem o ponto  $\tau = 0$ , obtivemos os resultados para  $F_1(\mu)$  coincidindo com os resultados exatos para  $LTS_8$  e para  $LTS_{12}$ , como apresentado nas tabelas anteriores.

Para este caso, esperamos encontrar os coeficientes  $\{a_k\}$  iguais a unidade, já que a base  $\{H_k(\mu)\}$  escolhida é exatamente igual à função  $F_1(\mu)$  tomada na condição de contorno, que são os polinômios de Legendre de ordem par. Na verdade, essa primeira aplicação foi assim escolhida para que a precisão dos coeficientes  $\{a_k\}$  pudessem servir como base para a análise da precisão dos resultados obtidos pelo método proposto.

O mesmo problema foi resolvido usando a aproximação  $LTS_{12}$  a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação em pontos próximos à fronteira esquerda,  $\tau = 0, 5$  e  $10$  e em pontos distribuídos no domínio,  $\tau = 0, 50$  e  $100$ , respectivamente, com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 11$ . Os resultados são apresentados nas tabelas 4.3 e 4.4.

Tabela 4.3: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 5$  e  $10$  para o primeiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.768339	2.768339
$F_1(\mu_2)$	1.959112	1.959112
$F_1(\mu_3)$	1.078480	1.078480
$F_1(\mu_4)$	0.619440	0.619440
$F_1(\mu_5)$	0.650664	0.650664
$F_1(\mu_6)$	0.840788	0.840788

Tabela 4.4: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 50$  e  $100$  para o primeiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.768339	2.768340
$F_1(\mu_2)$	1.959112	1.959112
$F_1(\mu_3)$	1.078480	1.078480
$F_1(\mu_4)$	0.619440	0.619440
$F_1(\mu_5)$	0.650664	0.650664
$F_1(\mu_6)$	0.840788	0.840789

Aumentamos o número de pontos do interior do domínio, ou seja, tomamos seis pontos e analisamos os casos a seguir: usando a aproximação  $LTS_8$  a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação em pontos próximos à fronteira esquerda,  $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$  e  $10$  e nos pontos distribuídos no domínio,  $\tau = 0, 20, 40, 60, 80$  e  $100$ , respectivamente, com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 7$ . Os resultados são apresentados nas tabelas 4.5 e 4.6.

Tabela 4.5: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$  e  $10$  para o primeiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.588108	2.588108
$F_1(\mu_2)$	1.127350	1.127350
$F_1(\mu_3)$	0.651363	0.651363
$F_1(\mu_4)$	0.780216	0.780216

Tabela 4.6: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 20, 40, 60, 80$  e  $100$  para o primeiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.588108	2.588017
$F_1(\mu_2)$	1.127350	1.127714
$F_1(\mu_3)$	0.651363	0.650872
$F_1(\mu_4)$	0.780216	0.780483

Para a aproximação  $LTS_{12}$  a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação nos pontos  $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$  e  $10$  e também nos pontos  $\tau = 0, 20, 40, 60, 80$  e  $100$ , respectivamente, com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 11$ , os resultados obtidos são apresentados nas tabelas 4.7 e 4.8.

Tabela 4.7: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$  e  $10$  para o primeiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	4.064675	4.064675
$F_1(\mu_2)$	1.042449	1.042449
$F_1(\mu_3)$	1.170955	1.170955
$F_1(\mu_4)$	0.740750	0.740750
$F_1(\mu_5)$	0.792950	0.792950
$F_1(\mu_6)$	0.697098	0.697098

Tabela 4.8: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 20, 40, 60, 80$  e  $100$  para o primeiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	4.064675	4.431472
$F_1(\mu_2)$	1.042449	5.293837
$F_1(\mu_3)$	1.170955	1.648882
$F_1(\mu_4)$	0.740750	4.873837
$F_1(\mu_5)$	0.792950	8.185236
$F_1(\mu_6)$	0.697098	7.302393

Notamos que, para esse número de pontos tomados, até  $\tau = 20$ , encontramos concordância de 2 casas decimais. Antecipamos aqui que resultado análogo só é obtido pela “formulação 2” tomando pontos até  $\tau = 12$ .

É observado então que a escolha de pontos  $\{\tau_i\}$  afeta altamente o condicionamento do sistema linear (2.2.8). Isso fica evidenciado através do número de condicionamento da matriz do sistema, obtido da subrotina DGECO. Embora não tenhamos feito um estudo definitivo dessa questão, observamos que o esquema

definido por

$$\tau_i = \frac{i-1}{k_1} \tau_*, \quad (4.2.3)$$

para  $i = 1, 2, \dots, k_1 + 1$ , com  $\tau_* = \min\{10.0, \tau_0\}$ , ou seja, para pontos próximos à fronteira esquerda, proporciona uma melhora nos resultados sobre o uso da distribuição uniforme de pontos.

No segundo caso, consideramos os mesmos dados anteriores com as condições de contorno somadas ao termo de reflexão especular, ou seja,  $\rho_1^s = 0.25$  e  $\rho_2^s = 0.25$ .

Inicialmente usamos a aproximação  $LTS_8$  a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação em pontos próximos à fronteira esquerda,  $\tau = 0, 5$  e  $10$  e em pontos distribuídos no domínio,  $\tau = 0, 50$  e  $100$ , respectivamente, com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 7$ . Os resultados são apresentados nas tabelas 4.9 e 4.10.

Tabela 4.9: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 5$  e  $10$  para o segundo caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.520529	2.520529
$F_1(\mu_2)$	1.209293	1.209293
$F_1(\mu_3)$	0.587301	0.587301
$F_1(\mu_4)$	0.804245	0.804245

Tabela 4.10: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0$ , 50 e 100 para o segundo caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.520529	2.520529
$F_1(\mu_2)$	1.209293	1.209293
$F_1(\mu_3)$	0.587301	0.587301
$F_1(\mu_4)$	0.804245	0.804245

Para a aproximação  $LTS_{12}$ , a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação em pontos próximos à fronteira esquerda,  $\tau = 0, 5$  e  $10$  e em pontos distribuídos no domínio,  $\tau = 0, 50$  e  $100$ , respectivamente, com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 11$ , os resultados são apresentados nas tabelas 4.11 e 4.12.

Tabela 4.11: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0$ , 5 e 10 para o segundo caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.768339	2.768339
$F_1(\mu_2)$	1.959112	1.959112
$F_1(\mu_3)$	1.078480	1.078480
$F_1(\mu_4)$	0.619440	0.619440
$F_1(\mu_5)$	0.650664	0.650664
$F_1(\mu_6)$	0.840788	0.840788

Tabela 4.12: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0$ , 50 e 100 para o segundo caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.768339	2.768339
$F_1(\mu_2)$	1.959112	1.959112
$F_1(\mu_3)$	1.078480	1.078480
$F_1(\mu_4)$	0.619440	0.619440
$F_1(\mu_5)$	0.650664	0.650664
$F_1(\mu_6)$	0.840788	0.840788

Aumentamos o número de pontos do interior do domínio, ou seja, tomamos seis pontos e analisamos os seguintes casos: usando a aproximação  $LTS_8$  a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação em pontos próximos à fronteira esquerda,  $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$  e  $10$  e em pontos  $\tau = 0, 20, 40, 60, 80$  e  $100$ , respectivamente, com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 7$ , os resultados são apresentados nas tabelas 4.13 e 4.14.

Tabela 4.13: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0$ , 2, 4, 6, 8 e 10 para o segundo caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.588108	2.588108
$F_1(\mu_2)$	1.127350	1.127350
$F_1(\mu_3)$	0.651363	0.651363
$F_1(\mu_4)$	0.780216	0.780216

Tabela 4.14: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 20, 40, 60, 80$  e  $100$  para o segundo caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	2.588108	2.588108
$F_1(\mu_2)$	1.127350	1.127350
$F_1(\mu_3)$	0.651363	0.651363
$F_1(\mu_4)$	0.780216	0.780216

Usamos a aproximação  $LTS_{12}$  a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação em pontos próximos à fronteira esquerda,  $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$  e  $10$  com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 11$ , obtemos os resultados apresentados na tabela 4.15.

Tabela 4.15: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$  e  $10$  para o segundo caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	4.064675	4.064675
$F_1(\mu_2)$	1.042449	1.042449
$F_1(\mu_3)$	1.170955	1.170955
$F_1(\mu_4)$	0.740750	0.740750
$F_1(\mu_5)$	0.792950	0.792950
$F_1(\mu_6)$	0.697098	0.697098

Fica claro que, nos dois casos apresentados, à medida que aumentamos o sistema para a determinação dos  $a_k$  (tipicamente a partir de 8), os resultados para  $F_1(\mu)$  vão ficando cada vez mais distorcidos (número de condicionamento da matriz

aumenta rapidamente).

No terceiro caso, para  $\omega = 0.99$ ,  $\tau_0 = 100.0$ ,  $\rho_\beta^s = 0$ ,  $\rho_\beta^d = 0$  e diferentes graus de anisotropia  $L$ , modificamos a condição de contorno para  $F_1(\mu) = \sqrt{1 - \mu^2}$ .

Usando a aproximação  $LTS_8$  a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação em pontos próximos à fronteira esquerda,  $\tau = 0, 5$  e  $10$  e em pontos  $\tau = 0, 50$  e  $100$ , respectivamente, com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 7$ , os resultados obtidos são apresentados nas tabelas 4.16 e 4.17.

Tabela 4.16: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 5$  e  $10$  para o terceiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	0.279004	0.283910
$F_1(\mu_2)$	0.604419	0.592863
$F_1(\mu_3)$	0.850774	0.864215
$F_1(\mu_4)$	0.983032	0.976086

Tabela 4.17: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0$ , 50 e 100 para o terceiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	0.279004	0.303677
$F_1(\mu_2)$	0.604419	0.585939
$F_1(\mu_3)$	0.850773	0.854811
$F_1(\mu_4)$	0.983032	0.984397

Para a aproximação  $LTS_{12}$  a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação em pontos próximos à fronteira esquerda,  $\tau = 0, 5$  e 10 e em pontos  $\tau = 0, 50$  e 100, respectivamente, com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 11$ , obtemos os resultados das tabelas 4.18 e 4.19.

Tabela 4.18: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0$ , 5 e 10 para o terceiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	0.191151	0.226390
$F_1(\mu_2)$	0.427284	0.402529
$F_1(\mu_3)$	0.638161	0.630967
$F_1(\mu_4)$	0.809356	0.823093
$F_1(\mu_5)$	0.929892	0.936625
$F_1(\mu_6)$	0.992127	0.981279

Tabela 4.19: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0$ , 50 e 100 para o terceiro caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	0.191151	0.280313
$F_1(\mu_2)$	0.427284	0.418539
$F_1(\mu_3)$	0.638161	0.612069
$F_1(\mu_4)$	0.809356	0.798619
$F_1(\mu_5)$	0.929892	0.934404
$F_1(\mu_6)$	0.992127	1.002831

Nossa intenção, nesse caso, foi evidenciar a importância da escolha da base usada na decomposição da condição de contorno e dos problemas diretos, no caso da “formulação 1”. É claro que essa escolha está associada às características da função  $F_1(\mu)$ , como mostram os resultados até aqui apresentados. No entanto, verificamos que mesmo quando os valores computados de  $F_1(\mu)$  não são tão precisos (como os apresentados acima), os valores para a densidade de radiação aproximada, calculada a partir da aproximação de  $F_1(\mu)$ , concordam em pelo menos 8 dígitos com a densidade de radiação obtida na solução do problema direto. Como nos casos anteriores, a distribuição e o número de pontos tomados continuam influenciando grandemente.

No quarto caso, consideramos

$$F_1(\mu) = \sqrt{1 - \mu^2} + \frac{1}{1 + \mu^2} + \mu \lg(\mu)e^{-\mu}. \quad (4.2.4)$$

Para a aproximação  $LTS_8$  a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação em pontos próximos à fronteira esquerda,  $\tau = 0, 5$  e  $10$  e nos pontos  $\tau = 0, 50$  e  $100$ , respectivamente, com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 7$ , os resultados obtidos são apresentados nas tabelas 4.20 e 4.21.

Tabela 4.20: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 5$  e  $10$  para o quarto caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	0.784359	0.794786
$F_1(\mu_2)$	1.134517	1.109954
$F_1(\mu_3)$	1.434462	1.463033
$F_1(\mu_4)$	1.691529	1.676766

Tabela 4.21: Problema inverso -  $LTS_8$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 50$  e  $100$  para o quarto caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	0.784359	0.835503
$F_1(\mu_2)$	1.134517	1.095690
$F_1(\mu_3)$	1.434462	1.443663
$F_1(\mu_4)$	1.691529	1.693885

Usando a aproximação  $LTS_{12}$  a partir de valores conhecidos da intensidade de radiação em pontos próximos à fronteira esquerda,  $\tau = 0, 5$  e  $10$  e em pontos  $\tau = 0, 50$  e  $100$ , respectivamente, com espessura  $\tau_0 = 100.0$  e grau de anisotropia  $L = 11$ , obtemos os resultados apresentados nas tabelas 4.22 e 4.23.

Tabela 4.22: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 5$  e  $10$  para o quarto caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	0.693610	0.748537
$F_1(\mu_2)$	0.940613	0.909071
$F_1(\mu_3)$	1.172782	1.146977
$F_1(\mu_4)$	1.379154	1.396608
$F_1(\mu_5)$	1.556058	1.597335
$F_1(\mu_6)$	1.747130	1.707570

Tabela 4.23: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 0, 50$  e  $100$  para o quarto caso

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	0.693610	1.012033
$F_1(\mu_2)$	0.940613	0.987307
$F_1(\mu_3)$	1.172782	1.054636
$F_1(\mu_4)$	1.379154	1.277022
$F_1(\mu_5)$	1.556058	1.586482
$F_1(\mu_6)$	1.747130	1.812878

Nos casos aqui tratados, testamos apenas dois tipos diferentes de bases: polinômios de Legendre e polinômios de Chebyshev, sem resultados que fossem significativamente diferentes.

Notamos ainda que, nesse último caso, os resultados obtidos pelo método dos harmônicos esféricos [2] para  $N = 199$ , ou seja,  $P_{199}$ , apresentam concordância de apenas duas casas decimais entre o valor exato e o calculado da condição de contorno.

Testamos, ainda, o primeiro caso com  $\omega = 0,3$  e observamos que os

resultados foram análogos aos obtidos aqui. Porém, os resultados para  $F_1(\mu)$  vão ficando cada vez mais distorcidos para  $K_1$  (número de pontos tomados) menor que para o caso com  $\omega = 0,99$  (aproximadamente 6).

Tratamos, agora, das aplicações em que usamos a “formulação 2”. Em [1], foi apresentada a solução para o problema inverso em meios linearmente anisotrópicos, ou seja,  $L = 1$  e cuja distribuição dada foi obtida a partir da condição de contorno do tipo constante, isto é,  $F_1(\mu) = 1.0$  e  $F_2(\mu) = 0.0$ . Além disso, a espessura da placa é  $\tau_0 = 100.0$  e  $\omega = 0.99$ .

A mudança de base na solução  $LTS_N$ , recentemente implementada por Barichello et al. [5], foi testada para comparação dos resultados obtidos em [1], fornecendo resultados como os da tabela abaixo.

Tabela 4.24: Problema inverso -  $LTS_4$  - intensidade de radiação tomada em  $\tau = 12, 14, 16$  e  $18$

$F_1(\mu)$	exata	calculada
$F_1(\mu_1)$	1.000000	0.999997
$F_1(\mu_2)$	1.000000	1.000007

Esses resultados só eram obtidos anteriormente para pontos tomados até  $\tau = 10$ , o que evidencia uma melhora, que também acontece para outros valores de  $N$ , em relação a formulação antiga.

Com o objetivo de obtermos resultados mais genéricos do que os obtidos anteriormente em [1], no que diz respeito ao grau de anisotropia e tipo das

condições de contorno, e também para efeito de comparação com a “formulação 1”, a “formulação 2” foi usada na solução do problema inverso cujas condições de contorno são do tipo  $F_1(\mu) = \sum_{k=0}^{k_1} P_{2k}(\mu)$ , onde  $k_1 = 5$ . Tomamos seis pontos do domínio para a “formulação 1”,  $\tau = 0, 2, 4, 6, 8$  e  $10$ , e número de pontos igual a  $N$  na “formulação 2”, ou seja, para o  $LTS_8$  tomamos  $\tau = 1, 2, \dots, 8$ , para o  $LTS_{12}$  tomamos  $\tau = 1, 2, \dots, 12$  e grau de anisotropia  $L = 1$ , obtivemos:

Tabela 4.25: Problema inverso -  $LTS_8$  - comparação das duas formulações

$F_1(\mu)$	exata	“formulação 1”	“formulação 2”
$F_1(\mu_1)$	2.588108	2.588108	2.588108
$F_1(\mu_2)$	1.127350	1.127350	1.127350
$F_1(\mu_3)$	0.651363	0.651363	0.651363
$F_1(\mu_4)$	0.780216	0.780216	0.780216

Tabela 4.26: Problema inverso -  $LTS_{12}$  - comparação das duas formulações

$F_1(\mu)$	exata	“formulação 1”	“formulação 2”
$F_1(\mu_1)$	4.064675	4.064675	4.064672
$F_1(\mu_2)$	1.042449	1.042449	1.042451
$F_1(\mu_3)$	1.170955	1.170955	1.170954
$F_1(\mu_4)$	0.740750	0.740750	0.740750
$F_1(\mu_5)$	0.792950	0.792950	0.792950
$F_1(\mu_6)$	0.697098	0.697098	0.697098

Apesar dos resultados concordarem com os exatos, em pelo menos 4 dígitos, ao aumentarmos o valor de  $N$ , aumenta o número de pontos a serem tomados na “formulação 2”, aumentando assim a dimensão do sistema linear a ser resolvido e o mal condicionamento. Podemos observar o mal condicionamento a par-

tir do monitoramento do número de condicionamento que sai da subrotina DGEÇO [10]. Isso impossibilita a utilização de aproximações de maior ordem  $N$ , no caso da “formulação 2”, o que seria desejável.

## 5 CONCLUSÕES

Analisando os resultados numéricos obtidos na solução do problema inverso, dito de condições de contorno, pelo método  $LTS_N$ , alguns pontos podem ser ressaltados.

Como é característico dos problemas inversos, o mal condicionamento está presente e fica evidenciado quando se aumenta o número de pontos no interior do domínio, onde a densidade de radiação é conhecida, e também é claramente dependente da distribuição dos pontos considerados, ou seja, resultados satisfatórios são obtidos para um número de pontos menor do que 8 e tomados próximos da fronteira  $\tau = 0$  (até  $\tau = 10$  para  $\tau_0 = 100$ ).

Nesse sentido, a formulação apresentada no capítulo 2 parece mais conveniente já que podemos tomar um número de pontos quaisquer, onde a densidade é conhecida, independentemente do valor de  $N$  usado, reduzindo o sistema linear associado ao problema inverso e, conseqüentemente, garantindo um melhor condicionamento. Também permitindo que o problema direto seja resolvido com maior precisão (maior ordem da aproximação).

Como foi citado, a modelagem aqui apresentada pode não representar a abordagem mais realística do problema, mas dentro do modelo unidimensional busca um tratamento analítico. Isso talvez não seja possível no caso de problemas mais reais, que deverão demandar modelos mais complexos (multidimensionais). No

entanto, em trabalhos futuros, considerando os recentes avanços na implementação da formulação  $LTS_N$  para valores de  $N$  grande e a possibilidade do uso da formulação descrita no capítulo 2, ainda podemos incluir nesse modelo a consideração do espectro de energia da radiação.

Finalmente, a investigação de questões como existência e unicidade, como em [12], devem ser consideradas para justificar a solução formal apresentada nesse trabalho.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] BARICHELO, L. B., Formulação Analítica para Solução do Problema de Ordenada Discreta Unidimensional. Tese de Doutorado pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC) - UFRGS, Porto Alegre,(1992).
- [2] BARICHELO, L. B., GARCIA, R. D. M. and SIEWERT, C. E., On inverse boundary - condition problems in radiative transfer. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v.57(3), p. 405-410, (1997).
- [3] BARICHELO, L. B. and VILHENA, M. T., Um problema inverso em transporte de nêutrons e radiação, Proc. **IX ENFIR** , p. 22-24, Caxambu,(1993).
- [4] BARICHELO, L. B. and VILHENA, M. T., A general approach to one - group one dimensional transport equation. **Kerntechnik**, v.58, n.3, p.182-184, (1993).
- [5] BARICHELO, L. B., CARDONA, A. V. and VILHENA, M. T., The  $LTS_N$  formulation for large thickness slab, a ser submetido.
- [6] BRANCHER, J. D., Formulação analítica para a solução do problema de ordenada discreta pelo método  $LTS_N$ , para valores de N grandes. Exame de

Qualificação, requisito para obtenção do título de Doutor em Engenharia pelo Programa de Pós-Graduação de Minas, Metalúrgica e dos Materiais-PPGEM-UFRGS, Porto Alegre.(1996).

- [7] BRANCHER, J. D., SEGATTO, C. F. and VILHENA, M. T., Solution of one dimensional radiative-transfer problems by the  $LTS_N$  method, a ser submetido.
- [8] CASE, K. M., Inverse Problem in Transport Theory, **The Physics of Fluids**, v.16, n.10, p. 1607-1611, (1973).
- [9] CHANDRASEKHAR, S., **Radiative Transfer**, Oxford University Press, London, (1950).
- [10] DONGARRA, J. J., BUNCH, J. R., MOLER, C. B. and STEWART, G. W., LINPACK Users' Guide (**SIAM**), Philadelphia,(1979).
- [11] KAPER, H. G., SHUTLIS, J. K. and VENINGA, J. G., Numerical evaluation of the slab albedo problem solution in one-speed anisotropic transport theory, **Journal of Computational Physics**, v.6, p. 288-313, (1970).
- [12] LARSEN, E. W., The inverse source problem in radiative transfer, **Journal of quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v.15, p.1-5, (1975).
- [13] McCORMICK, N. J., Inverse radiative transfer problems: a review, **Nuclear Science and Engineering**, v.112, p.185-198, (1992).

- [14] McCORMICK, N. J. and SANCHEZ, R., Inverse problem transport calculations for anisotropic scattering coefficients, **Journal of Mathematics and Physics**, v.22, n.1, p.199-208,(1981).
- [15] OLIVEIRA, J. V. P. de, Formulação  $LTS_N$  para o problema de ordenada discreta com anisotropia.Dissertação de Mestrado - UFRGS, Porto Alegre, (1993).
- [16] SIEWERT, C. E., An inverse source problem in radiative transfer, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v.50, p. 603-609, (1993).
- [17] SIEWERT, C. E., A radiative transfer inverse-source problem for a sphere, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v.52, n.2, p. 157-160, (1994).
- [18] SILVA NETO, A. J, and OZISIK, M. N., An inverse heat conduction problem of estimating initial condition, **XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, p. 613-616, (1993).
- [19] STRANG, G., **Linear Algebra and Its Applications**. New York, Academic Press,(1976).
- [20] STRECK, E. E., Solução Analítica para a Aproximação  $P_N$  da Equação de Transporte Linear Unidimensional. Tese de Doutorado do Programa

- de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), UFRGS, Porto Alegre, (1993).
- [21] TRZASKA, Z., An efficient algorithm for partial fraction expansion of the linear matrix pencil inverse. **Journal of the Franklin Institute**, v.324, p. 465-477, (1987).
- [22] VILHENA, M. T. and BARICHELLO, L. B., A new analytical approach to solve the neutron transport equation. **Kerntechnik**, v.56, n.5, p. 334-336, (1991).

## ANEXO A-1 FORMULAÇÃO PARA INVERSÃO DA MATRIZ $\mathbf{A}_N(S)$

### A-1.1 Redução da matriz pela Decomposição de Schur

Consideremos a matriz  $\mathbf{A}_N(s)$  escrita na forma

$$\mathbf{A}_N(s) = (s\mathbf{I} + \mathbf{A}), \quad (\text{A-1.1.1})$$

onde  $\mathbf{A}$  é uma matriz numérica, sendo a inversa dada pela expressão

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = (s\mathbf{I} + \mathbf{A})^{-1}. \quad (\text{A-1.1.2})$$

Aplicamos a fatoração de Schur [19] e a matriz original é então decomposta em

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^T, \quad (\text{A-1.1.3})$$

onde  $\mathbf{T}$  é uma matriz triangular superior e  $\mathbf{U}\mathbf{U}^T = \mathbf{I}$ .

Substituindo a expressão (A-1.1.2) em (A-1.1.3)

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = (s\mathbf{U}\mathbf{U}^T + \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^T)^{-1}, \quad (\text{A-1.1.4})$$

onde  $\mathbf{U}$  e  $\mathbf{U}^T$  são matrizes unitárias, e a expressão (A-1.1.4) é escrita na forma

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = (\mathbf{U}(s\mathbf{I} + \mathbf{T})\mathbf{U}^T)^{-1}, \quad (\text{A-1.1.5})$$

que pode ser reescrita como:

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = (\mathbf{U})(s\mathbf{I} + \mathbf{T})^{-1}\mathbf{U}^T. \quad (\text{A-1.1.6})$$

Assim a matriz a ser invertida é da forma

$$s\mathbf{I} + \mathbf{T} = \begin{bmatrix} s + t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1N} \\ 0 & s + t_{22} & \cdots & t_{2N} \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s + t_{NN} \end{bmatrix}. \quad (\text{A-1.1.7})$$

## A-1.2 Inversão da matriz por particionamento

Da matriz definida na expressão (A-1.1.7) concluímos que

$$\Delta_N = \det(s\mathbf{I} + \mathbf{T}) = \prod_{i=1}^N (s + t_{ii}). \quad (\text{A-1.2.1})$$

Agora, para a determinação da matriz inversa de  $(s\mathbf{I} + \mathbf{T})$ , usamos um resultado

válido para inversão de matrizes em bloco

$$\begin{bmatrix} C & D \\ 0 & E \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} C^{-1} & -C^{-1}DE^{-1} \\ 0 & E^{-1} \end{bmatrix}. \quad (\text{A-1.2.2})$$

e estabelecemos um processo recursivo tal que

$$\mathbf{S}_1 = [s + t_{11}], \quad (\text{A-1.2.3})$$

$$\mathbf{S}_2 = \begin{bmatrix} s + t_{11} & t_{12} \\ 0 & s + t_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1 & t_{12} \\ 0 & s + t_{22} \end{bmatrix}, \quad (\text{A-1.2.4})$$

$$\mathbf{S}_3 = \begin{bmatrix} s + t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ 0 & s + t_{22} & t_{23} \\ 0 & 0 & s + t_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_2 & t_{13} \\ 0 & t_{23} \\ 0 & 0 & s + t_{33} \end{bmatrix}, \quad (\text{A-1.2.5})$$

e para a  $k$ -ésima matriz, temos

$$\mathbf{S}_k = \begin{bmatrix} s + t_{11} & t_{12} & t_{13} & \cdots & t_{1k} \\ 0 & s + t_{22} & t_{23} & \cdots & t_{2k} \\ 0 & 0 & s + t_{33} & \cdots & t_{3k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & s + t_{kk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & & & t_{1k} \\ & & & & t_{2k} \\ & \mathbf{S}_{k-1} & & & t_{3k} \\ & & & & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & s + t_{kk} \end{bmatrix}. \quad (\text{A-1.2.6})$$

A matriz inversa de  $\mathbf{S}_k$  é determinada usando o resultado da equação (A-1.2.2). Esse procedimento fornece a seguinte fórmula recursiva:

$$\mathbf{S}_k^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{k-1}^{-1} & -\frac{\mathbf{S}_{k-1}^{-1} \mathbf{v}}{s + t_{kk}} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{s + t_{kk}} \end{bmatrix}, \quad \text{para } k = 2, \dots, N, \quad (\text{A-1.2.7})$$

onde o vetor  $\mathbf{V}$  é definido como

$$\begin{bmatrix} t_{1k} & t_{2k} & \dots & t_{k-1k} \end{bmatrix}^T. \quad (\text{A-1.2.8})$$

Para efetuar a transformada inversa de Laplace da matriz  $(s\mathbf{I} + \mathbf{T})$ , é necessário encontrar a adjunta. Para isso, um esquema recursivo é também definido. Então multiplicamos a equação (A-1.2.8) pela equação (A-1.2.1) obtendo

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_k) = \mathbf{S}_k^{-1} \det(\mathbf{S}_k) = \begin{bmatrix} \text{Adj}(\mathbf{S}_{k-1})(s + t_{kk}) & -\text{Adj}(\mathbf{S}_{k-1})\mathbf{v} \\ 0 & \dots & 0 & \det(\mathbf{S}_{k-1}) \end{bmatrix}. \quad (\text{A-1.2.9})$$

Para concluir, usamos a técnica de expansão de Heaviside e encontramos a seguinte expressão para a matriz inversa de  $(s\mathbf{I} + \mathbf{A})$

$$\mathcal{L}^{-1}((s\mathbf{I} + \mathbf{A})^{-1}) = U \mathcal{L}^{-1}((s\mathbf{I} + \mathbf{T})^{-1}) U^T = U \left[ \sum_{l=1}^N \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_N)|_{s_l}}{\frac{d}{ds}(\Delta_l)|_{s_l}} e^{s_l t} \right] U^T. \quad (\text{A-1.2.10})$$